

## 鳥居 肇 (とりいはじめ)

【研究課題名】水とイオンと生体関連分子の複合相互作用系における構造形成・動的挙動とスペクトル



静岡大学 教育学部 教授

【E-mail】torii.hajime@shizuoka.ac.jp

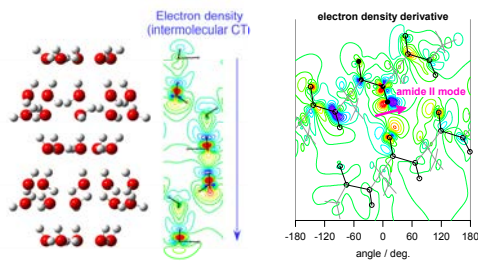
【専門】理論化学

【キーワード】分子間相互作用, 赤外強度, 振動スペクトル  
タンパク質, 水, イオン, 理論

さまざまな理論手法を用いて、水・イオン・生体関連分子が関わる分子間相互作用に起因する分子ダイナミクスと振動スペクトル強度・形状を解析します。

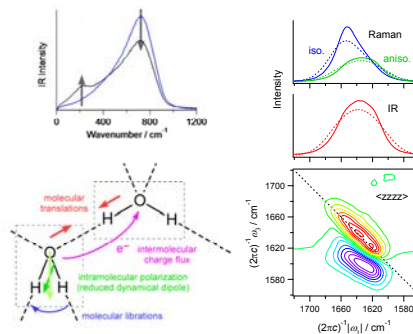
## 〈研究グループアクティビティ〉

## 電子密度解析による赤外強度生成メカニズムなどの解明



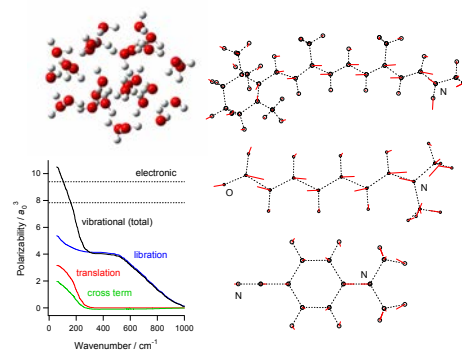
ペプチド鎖および水クラスターを対象とした電子密度解析

## MD を併用したスペクトルのシミュレーション



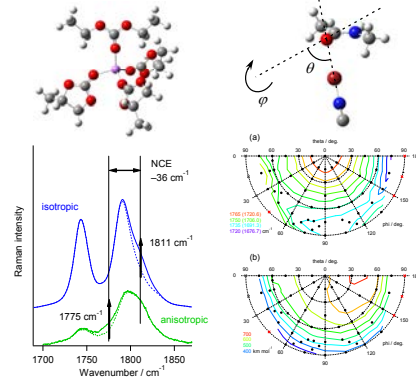
液体の水および水溶液中ペプチド鎖の振動スペクトルの計算

## 新規理論手法による分子振動の解析



水クラスターの振動分極率および共役π電子系の intensity carrying modes

## 分子間相互作用の基礎論



ハロゲン結合やイオン周囲の分子集合の振動スペクトルへの影響

## Hajime Torii

【Research Subject】 Structural Formation, Dynamical Behavior, and Spectra of Complex Interaction Systems of Water, Ions, and Biomolecules



**Professor**

**Shizuoka University**

【E-mail】 torii.hajime@shizuoka.ac.jp

【Speciality】 Theoretical Chemistry

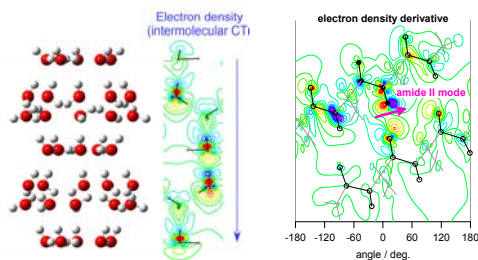
【Keywords】 Intermolecular Interaction, Infrared Intensity,

Vibrational Spectrum, Proteins, Water, Ions, Theory

Intensities and shapes of vibrational spectra and dynamics arising from intermolecular interactions in liquid-state systems including biomolecules, ions, and water are analyzed by using various theoretical techniques.

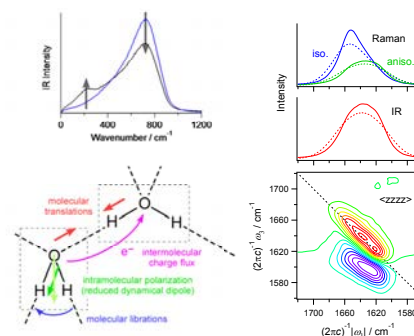
### Research Group Activity

Study on the IR intensity generation mechanism by electron density analysis



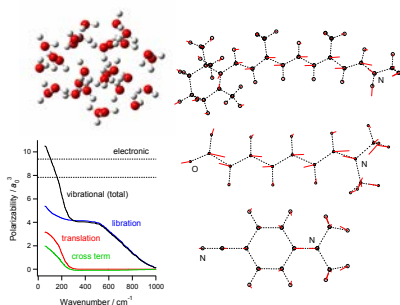
Electron density analysis for peptide chains and water clusters

Spectral simulations based on combined MD + other techniques



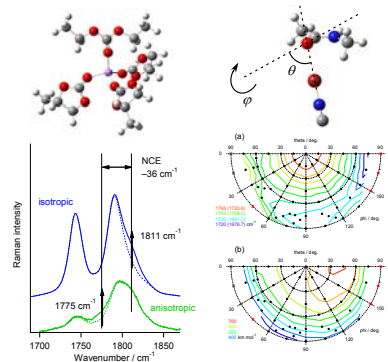
Calculated vibrational spectra of liquid water and a tetrapeptide in aqueous solution

Vibrational analysis with novel theoretical methods



Vibrational polarizabilities of water clusters and the intensity carrying modes of conjugated  $\pi$ -electron systems

Basic studies on intermolecular interactions



Effects of halogen bonding and molecular clustering around ion on vibrational spectra